

2. www.elk.sourceforge.net
3. Anisimov V. I., Hlubina R. et al., Phys. Rev. Lett., **89**, 257203 (2002)
4. Wappling R. and Haggstorm L., Phys. Lett. **28A**, 173(1968)
5. Lundgren L., Blom K.A., and Beckman O., Phys. Lett. **28A**, 175 (1968)

СТЕКЛОВАНИЕ И КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ КОНДЕНСАТА ПРИ ПОЛУЧЕНИИ ГИДРАТА МЕТОДОМ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОСАЖДЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПУЧКОВ

Анисимов И.С.^{1*}, Виноградов А.В.²

¹)Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²)Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: Fiar920@gmail.com

Известные в настоящее время способы получения газовых гидратов связаны с использованием высоких давлений в лабораторном или технологическом оборудовании. Например, давление соответствующее условиям образования гидрата метана при температурах, близких 0 °С, составляет десятки бар, при комнатной температуре – сотни бар. Так же известны разработки проводимые в Институте теплофизики СО РАН, где газовые гидраты образуются в ударных трубах [1]. Между тем, как было показано в исследованиях, проведенных в Институте теплофизики УрО РАН, образование газовых гидратов возможно при больших отклонениях от условий равновесия фаз, при неравновесной низкотемпературной конденсации молекулярных пучков двухкомпонентных водных смесей [2].

Аморфные конденсаты водно-газовой смеси получали в вакуумном криостате осаждением молекулярных пучков на охлаждаемую жидким азотом медную подложку. Условия осаждения двухкомпонентных конденсатов при фиксированных расходах воды и газа позволяли получать образцы постоянного состава и обеспечивали отвод теплоты конденсации. Толщина осажденных образцов составляла 50–100 мкм. Для измерения диэлектрических свойств образцов использовался емкостный датчик, который представлял собой пленочный конденсатор, изготовленный методом фотолитографии.

В результате экспериментов было получено, что температура кристаллизации образца увеличивается от 159 К при нулевом содержании диоксида углерода до 167 К при его содержании 18 масс. %. Заметного влияния изменения концентрации газа в образце на температуру стеклования не обнаружено. Увеличение скорости нагревания приводило к смещению сигналов стеклования и кристаллизации в сторону высоких температур.

При кристаллизации конденсата происходит образование гидрата диоксида углерода. При атмосферном давлении сохранение газового гидрата наблюдали вплоть до ~270 К. Образцы, полученные при максимальном расходе диоксида

углерода без нарушения вакуума в криостате при конденсации такие, что единственный объем образовавшейся при кристаллизации газогидратной фазы содержит 150–170 объемов газообразного диоксида углерода. То есть содержали до 20–23 масс % диоксида углерода. Для метана же удалось получить 10–15 масс % (120–160 объемов), для пропана 10–13 масс % (50–70 объемов)

Результаты исследования показывают успешность применения метода конденсации молекулярных пучков для получения газовых гидратов. В перспективе метод может быть использован при получении гидрата водорода для решения проблемы его хранения и транспорта в связи с развитием водородной энергетики. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 14-08-31007 мол_а).

1. Накоряков В.Е., Донцов В.Е., Чернов А.А. Образование газовых гидратов в газожидкостной смеси за ударной волной // Доклады РАН, 2006.т. 411, № 2. с. 190–193.
2. Файзуллин М.З., Решетников А.В., Коверда В.П. Синтез гидрата метана при низкотемпературной конденсации молекулярных пучков // Докл. РАН. 2010. Т. 433. № 5. С. 622–624.

РАЗРАБОТКА МЕТОДА ДЛЯ РАСЧЕТА ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Бадртдинов Д.И.^{*}, Мазуренко В.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

^{*}E-mail: reason2205@ya.ru

Сильнокоррелированные соединения представляют значительный интерес для исследователей благодаря уникальным характеристикам, которые могут быть применены в разработке новых технологий [1], и здесь магнитные взаимодействия играют немаловажную роль в формировании свойств этих систем. Существует ряд методов для расчета обменного взаимодействия. Среди них можно выделить схемы расчета, основанные на разности энергий состояний с разными магнитными конфигурациями, или методы, предполагающие определение магнитных взаимодействий через функции Грина в базисе атомных орбиталей.

Целью данной работы является разработка вычислительного комплекса для расчета обменного взаимодействия модели Гайзенберга в базисе Ванье функций. В реальных соединениях наблюдается сильная гибридизация между металлами и лигандами, что хорошо видно на примере оксида никеля (NiO), где происходит перекрытие волновых функций d-оболочек никеля с p-оболочками кислорода (рис. 1). Это приводит к делокализации магнитного момента и изме-